Antonio Castaño Tierno
Víctor Pablo Galván Chacón
Febrero 2010

Ejercicio 4

Un gas de moléculas de masa m, confinadas en un plano infinito, que no interaccionan entre ellas, están situadas en un potencial central $U(r) = Cr^n$, donde C y n son constantes. Calcular $\langle U(r) \rangle$.

El Hamiltoniano del sistema es, en general, $H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + U(r)$.

Se nos pide calcular el valor medio del potencial $U(r)$, para lo cual utilizamos la distribución canónica. Sabemos que el valor medio de una variable dinámica cualquiera sobre esta distribución está dado por:

$$\overline{A} = \frac{\int dq\, dp \cdot A(q,p) \cdot e^{-\beta H(q,p)}}{\int dq\, dp \cdot e^{-\beta H(q,p)}}$$

Que, en nuestro caso, será:

$$\langle Cr^n \rangle = C\overline{r^n} = C \frac{\int_0^\infty d^2q \cdot r^n \cdot e^{-\beta r^n}}{\int_0^\infty d^2q \cdot e^{-\beta r^n}} = C \frac{\int_0^\infty dr \cdot r \cdot r^n \cdot e^{-\beta r^n}}{\int_0^\infty dr \cdot r \cdot e^{-\beta r^n}}$$

(La r que introducimos se debe al jacobiano, por ser en dos dimensiones.)

Podemos hacer esto porque la parte del Hamiltoniano que depende de p factoriza y sale de ambas integrales, y al dividir sale 1.

Vemos que la integral del numerador es menos la derivada respecto a β de la del denominador:

$$\int_0^\infty d^2r \cdot r \cdot r^n \cdot e^{-\beta r^n} = -\frac{\delta \int_0^\infty dr \cdot r \cdot e^{-\beta r^n}}{\delta\beta}$$

Por lo tanto, solo tendremos que calcular la integral $\int_0^\infty dr \cdot r \cdot e^{-\beta r^n}$, que se puede escribir como $\int_0^\infty t^{z-1} e^{-t}\, dt$, es decir, como la función $\Gamma(z)$.

Hacemos el cambio:

$$t = \beta r^n \rightarrow r = \left(\frac{t}{\beta}\right)^{1/n}$$
$$dr = \frac{dt}{n\beta r^{n-1}} = \frac{dt \cdot r}{n \cdot t}$$

Y la integral quedará como sigue:

$$\int_0^\infty dr \cdot r \cdot e^{-\beta r^n} = \beta^{-\frac{2}{n}} \cdot \int_0^\infty dt \cdot t^{\frac{2}{n}-1} \cdot e^{-t} = \beta^{-\frac{2}{n}} \cdot \Gamma\left[\frac{2}{n}\right]$$

Conocido el valor del denominador, podemos calcular el del numerador:

$$-\frac{\delta\left[\beta^{-\frac{2}{n}} \cdot \Gamma\left[\frac{2}{n}\right]\right]}{\delta\beta} = \Gamma\left[\frac{2}{n}\right] \cdot \frac{2}{n} \cdot \beta^{-\frac{2}{n}-1}$$

Debemos multiplicar por C, que habíamos dejado fuera de la integral. Así, el valor medio del potencial será:

$$\langle Cr^n \rangle = C \frac{\Gamma\left[\frac{2}{n}\right] \cdot \frac{2}{n} \cdot \beta^{-\frac{2}{n}-1}}{\beta^{-\frac{2}{n}} \cdot \Gamma\left[\frac{2}{n}\right]} = \frac{2C}{n} \cdot \beta^{-1} = \frac{2CK_BT}{n}$$